

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

گرایش حالت جامد

# رفتار دمای پایین در مدل نردبان اسپینی

از:

فاطمه امیری

اساتید راهنما:

دکتر سعید مهدوی فر

دکتر حمید رحیم پور سلیمانی

بهمن ماه ۸۹

به پاس تعبیر عظیم و انسانی شان از کلمه ایثار و از خودگذشتگی  
به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان که در این سردترین  
روزگاران بهترین پشتیبان است

و

به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی کند

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

## به نام آنکه جان را فکرت آموخت

سپاس بیکران یگانه خدای مهربانی را سزااست که در تنهایی یاور، در مشکلات حامی، در ناامیدی ها نوید دهنده شادی و در سرگشتگی ها راهنمای بندگان است.

بدون تردید انجام این رساله بدون همراهی و مساعدت و دعای خیر خانواده، اساتید و دوستان گرامیم میسر نبود. لذا بر خود واجب می دانم که از تمامی کسانی که در انحای مختلف اینجانب را یاری نمودند کمال امتنان و تشکر را نمایم.

از خانواده عزیزم به خاطر همه ی موهبت ها و فداکاری هایشان نهایت امتنان و تشکر را دارم.

از استاد بزرگوارم جناب آقای دکتر سعید مهدوی فر که در طول انجام پروژه با شکیبایی بی نظیر راهنما و راهگشای مشکلات بودند، به خاطر هر آنچه از علم و اخلاق از ایشان آموختم کمال سپاس گزاری را دارم. هر چند نگارش این چند سطر به هیچ وجه پاسخگوی محبت ایشان نیست.

از استاد ارجمندم جناب آقای دکتر رحیم پور سلیمانی به خاطر دانشی که از ایشان آموختم سپاس گزارم.

از اساتید محترم آقایان دکتر سید نادر رسولی و دکتر فرهاد اسمعیلی قدسی که در سمت اساتید ممتحن زحمت مطالعه ی پایان نامه را تقبل نمودند و آقای دکتر صابر فرجامی شایسته به عنوان نماینده ی تحصیلات تکمیلی که ریاست جلسه دفاع را بر عهده داشتند تشکر و قدردانی می نمایم.

از جناب آقای مصطفی معتمدی فر و سرکار خانم محبوبه شهری ناصری به دلیل کمک های بی دریغشان سپاس گزارم.

از دوستان عزیزم خانم ها ماندانا جلالی، سمیه نعمتی، نوشین محمودی، آزاده جباری، زهرا باژن، سعیده وحدتی و سایر دوستان عزیزم به خاطر همه ی کمک های علمی و معنوی و دلگرمی هایشان کمال تشکر را دارم.

# فهرست مطالب

صفحه	عنوان
خ	فهرست شکل ها .....
ر	چکیده .....
۱	مقدمه .....
۵	فصل اول: گذارهای فاز کوانتومی .....
۵	۱-۱ مقدمه .....
۶	۲-۱ مفاهیم اساسی گذارهای فاز .....
۷	۳-۱ گذار فاز کوانتومی .....
۱۰	فصل دوم: سیستم های اسپینی .....
۱۰	۱-۲ مواد مغناطیسی منظم .....
۱۱	۱-۲-۱ مواد فرومغناطیس .....
۱۱	۲-۱-۲ مواد پاد فرومغناطیس .....
۱۲	۳-۱-۲ مواد فری مغناطیس .....
۱۳	۳-۲ مدل هایزبرگ .....
۱۵	۴-۲ سیستم های مغناطیسی کم بُعد .....
۱۶	۵-۲ نردبان های اسپینی .....
۱۸	۶-۲ نردبان های دو- پا .....

۲۴	..... فصل سوم: اثر مگنتوکالریک ( MCE )
۲۴	..... ۱-۳ مقدمه
۲۷	..... ۲-۳ روش کلی ترمودینامیک
۳۳	..... ۳-۳ محاسبه اثر مگنتوکالریک با استفاده از تقریب میدان متوسط
۳۷	..... ۴-۳ تغییرات آنتروپی و اثر مگنتوکالریک
۴۰	..... ۵-۳ مگنتوکالریک در گذارهای فاز مغناطیسی منظم- بی نظم
۴۰	..... ۶-۳ روش های اندازه گیری اثر مگنتوکالریک
۴۱	..... ۱-۶-۳ اندازه گیری های مستقیم
۴۱	..... ۲-۶-۳ اندازه گیری های غیر مستقیم
۴۳	..... فصل چهارم: مطالعه ی رفتار دمای پایین در نردبان دو- پای اسپین ۱/۲
۴۳	..... ۱-۴ مقدمه
۴۴	..... ۲-۴ آنتروپی
۴۵	..... ۱-۲-۴ آنتروپی در ترمودینامیک
۴۷	..... ۳-۴ ظرفیت گرمایی
۴۹	..... ۴-۴ روش عددی
۴۹	..... ۵-۴ نردبان دو- پای دایمر شده اسپین- ۱/۲
۵۱	..... ۱-۵-۴ گرمای ویژه
۶۰	..... ۲-۵-۴ انرژی داخلی

۶۱	..... ۳-۵-۴ آنتروپی
۶۲	..... ۴-۵-۴ اثر مگنتو کالریک
۶۶	..... ۶-۴ نردبان دو-پای همسانگرد
۶۶	..... ۱-۶-۴ گرمای ویژه
۷۲	..... ۲-۶-۴ انرژی داخلی
۷۳	..... ۳-۶-۴ آنتروپی
۷۴	..... ۴-۶-۴ اثر مگنتو کالریک
۷۶	..... فصل پنجم: نتیجه گیری
۷۶	..... ۱-۵ نتیجه گیری
۷۸	..... ۲-۵ پیشنهاد برای ادامه ی کار
۷۹	..... پیوست الف: اثر مگنتو کالریک در قالب نظریه ی گذارهای فاز مرتبه ی دوم
۸۲	..... مراجع

# فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۸	شکل ۱-۱: ترازهای انرژی بر حسب پارامتر $g$ .....
۱۱	شکل ۱-۲: جهت گیری گشتاورهای مغناطیسی در بلورهای مختلف فرومغناطیس .....
۱۹	شکل ۲-۲: طرحی نمادین از یک نردبان اسپینی دو پا .....
	شکل ۳-۲: نمودار انرژی بر حسب میدان مغناطیسی خارجی اعمال شده برای یک پله با
۲۱	جفتدگی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس .....
۲۱	شکل ۴-۲: طرحی نمادین از نردبان دو پا با پاهای فرومغناطیس و پادفرومغناطیس .....
	شکل ۵-۲: نمودار فاز کیفی یک نردبان اسپینی دو پا با جفتدگی درون زنجیره ای به صورت تابعی از
۲۳	میدان مغناطیسی خارجی و ثابت تبدلی .....
۲۶	شکل ۱-۳: دو فرآیند که با اعمال یا حذف میدان مغناطیسی در یک سیستم مغناطیسی اتفاق می افتد .....
۳۸	شکل ۲-۳: نمودار $S-T$ نشان دهنده ی اثر مگنتوکالریک .....
۵۰	شکل ۱-۴: نردبان دوپا با قدرت برهمکنشی متناوب در راستای پله ها .....
	شکل ۲-۴: تفاوت بین انرژی حالت پایه و انرژی اولین حالت برانگیخته به صورت تابعی از میدان
۵۱	مغناطیسی .....
۵۲	شکل ۳-۴: نمودار گرمای ویژه بر حسب دما برای $h < h_{c_1}$ (ذره ۱۶) .....
۵۳	شکل ۴-۴: نمودار گرمای ویژه بر حسب دما برای $h_{c_1} < h < h_{c_-}$ (ذره ۱۶) .....
۵۴	شکل ۵-۴: نمودار گرمای ویژه بر حسب دما برای $h_{c_-} < h < h_{c_+}$ (ذره ۱۶) .....
۵۵	شکل ۶-۴: نمودار گرمای ویژه بر حسب دما برای $h_{c_+} < h < h_{c_1}$ (ذره ۱۶) .....



- شکل ۴-۷: نمودار گرمای ویژه بر حسب دما برای  $h > h_{c_1}$  (ذره ۱۶) ..... ۵۵
- شکل ۴-۸: نمودار گرمای ویژه بر حسب دما به ازای میدان های بحرانی (ذره ۱۶) ..... ۵۶
- شکل ۴-۹: گرمای ویژه بر حسب میدان برای  $T \ll 1$  (ذره ۱۶) ..... ۵۷
- شکل ۴-۱۰: گرمای ویژه بر حسب میدان برای  $0.75 < T < 2$  (ذره ۱۶) ..... ۵۸
- شکل ۴-۱۱: گرمای ویژه بر حسب میدان برای  $T \gg 2$  (ذره ۱۶) ..... ۵۹
- شکل ۴-۱۲: انرژی داخلی بر حسب دما برای میدان های مختلف (ذره ۱۶) ..... ۶۰
- شکل ۴-۱۳: آنتروپی بر حسب دما به ازای میدان های بحرانی (ذره ۱۶) ..... ۶۲
- شکل ۴-۱۴: خطوط هم آنتروپی یا منحنی های وامغناطش بی دررو نردبان دو-پای اسپینی برای تعداد ۸ ذره. .... ۶۳
- شکل ۴-۱۵: خطوط هم آنتروپی یا منحنی های وامغناطش بی دررو نردبان دو-پای اسپینی برای تعداد ۱۲ ذره ..... ۶۴
- شکل ۴-۱۶: خطوط هم آنتروپی یا منحنی های وامغناطش بی دررو نردبان دو-پای اسپینی برای تعداد ۱۶ ذره ..... ۶۴
- شکل ۴-۱۷: مقایسه خطوط هم آنتروپی یا منحنی های وامغناطش بی دررو نردبان دو-پای اسپینی برای تعداد ۱۲ و ۱۶ ذره ..... ۶۵
- شکل ۴-۱۸: منحنی گرمای ویژه بر حسب دما برای نردبان همسانگرد،  $h < h_{c_1}$  (ذره ۱۶) ..... ۶۷
- شکل ۴-۱۹: منحنی گرمای ویژه بر حسب دما برای نردبان همسانگرد،  $h_{c_1} < h < h_{c_2}$  (ذره ۱۲) ..... ۶۸
- شکل ۴-۲۰: منحنی گرمای ویژه بر حسب دما برای نردبان همسانگرد،  $h > h_{c_2}$  (ذره ۱۲) ..... ۶۸

شکل ۴-۲۱: گرمای ویژه بر حسب میدان مغناطیسی برای نردبان دو-پای همسانگرد،  $T \ll 1$  (ذره ۱۲) ... ۶۹

شکل ۴-۲۲: گرمای ویژه بر حسب میدان مغناطیسی برای نردبان دو-پای همسانگرد به صورت تجربی،

۷۰ .....  $T \ll 1$

شکل ۴-۲۳: گرمای ویژه بر حسب میدان مغناطیسی برای نردبان دو-پای همسانگرد،  $T > 1$  (ذره ۱۲) ..... ۷۱

شکل ۴-۲۴: گرمای ویژه بر حسب میدان مغناطیسی برای نردبان دو-پای همسانگرد به صورت تجربی

۷۱ .....  $T > 1$

شکل ۴-۲۵: انرژی داخلی نردبان همسانگرد بر حسب دما برای میدان های مختلف (ذره ۱۲) ..... ۷۲

شکل ۴-۲۶: آنتروپی نردبان همسانگرد بر حسب دما برای میدان های مختلف (ذره ۱۲) ..... ۷۳

شکل ۴-۲۷: خطوط هم آنتروپی یا منحنی های وامغناطش بی دررو نردبان دو-پای اسپینی همسانگرد

۷۴ ..... برای تعداد ۱۲ ذره

# چکیده

رفتار دمای پایین در مدل نردبان اسپینی

فاطمه امیری

در این پایان نامه رفتار دمای پایین سیستم نردبان دو پای اسپین ۱/۲ در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت مورد بررسی قرار گرفته است. برهم کنش تبادلی بین اسپین ها در هر دو راستای پله ها و پاها از نوع پاد فرومغناطیس انتخاب شده است. یک روش مناسب برای بررسی رفتار سیستم ها انجام آزمایش عددی است. برای انجام یک آزمایش عددی، بایستی هامیلتونی سیستم را به طور عددی قطری کرد. برای این منظور از روش عددی قطری سازی کامل برای به دست آوردن طیف کامل انرژی سیستم استفاده شده است. با استفاده از طیف کامل انرژی سیستم به منظور بررسی ترمودینامیک سیستم، آنتروپی، انرژی داخلی و گرمای ویژه محاسبه و از طرفی اثر مگنتو کالریک نیز بررسی شده است. در این پایان نامه نشان داده شده که در حضور میدان مغناطیسی گرمای ویژه سیستم رفتارهای گوناگونی را نشان می دهد. در میدان مغناطیسی ثابت، ساختاری نوین شامل سه قله در گرمای ویژه نسبت به دما دیده شده است. همچنین گرمای ویژه سیستم نسبت به میدان مغناطیسی اعمال شده نیز رفتارهای فیزیکی بسیار جالبی را نشان می دهد. به ویژه آزمایش عددی ما نشان می دهد که در دماهای نزدیک به صفر مطلق، منحنی گرمای ویژه دارای تقارن آینه ای است که در توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی است. از طرفی میدان مغناطیسی خارجی باعث تغییر نسبتاً بزرگی در آنتروپی سیستمهای اسپینی در دماهای محدود می شود که منجر به اثر مگنتو کالریک (تغییر دما در طی یک فرآیند وامغناطش بی دررو) می شود. علاوه بر این توابع پاسخ اثر مگنتو کالریک نیز مطالعه شده و نتایج به دست آمده نشان دهنده ی این است که در طی یک فرآیند وامغناطش بی دررو، دمای سیستم در مجاورت گذار فازهای کوانتومی کمینه می شود.

**کلید واژه:** نردبان دو-پای اسپین ۱/۲، گرمای ویژه، اثر مگنتو کالریک، گذارهای فاز کوانتومی، آنتروپی، قطری سازی کامل

# Abstract

## Low temperature behavior of spin ladder model

Fatemeh Amiri

In this thesis, low temperature behavior of the spin  $S=1/2$  two –leg ladder in presence of a uniform magnetic field is studied. The exchange couplings along both legs and rungs are considered to be antiferromagnetic. Numerical methods are suitable ways for solving many-body problems. Full diagonalization method is one of the numerical methods. By means of full diagonalization method, we can achieve all the excited energy spectrum of a finite size system. In order to understand low temperature behavior of the system, entropy, internal energy and the specific heat are calculated and also magnetocaloric effect (MCE) is considered. It is shown that the temperature-dependence of specific heat shows various behaviors in different regions of the magnetic field. It is found that in presence of magnetic field a novel structure with three peaks in the temperature-dependence of the specific heat is unveiled. Also the field- dependence of specific heat shows interesting behavior in low temperature region. The field-dependence of the specific heat is almost symmetric about the average of critical points and it is in good agreement with experimental results.

On the other hand, an external magnetic field induces large relative changes in the entropy of quantum spin systems at finite temperature. This leads to magnetocaloric effect, i.e. a change in temperature during an adiabatic demagnetization process. We computed the entropy of antiferromagnet spin  $1/2$  two leg ladder system in an external magnetic field. During an adiabatic demagnetization process temperature drops in the vicinity of a field induced zero-temperature quantum phase transitions.

**Key words:** Spin  $1/2$  two-leg ladder, Specific heat, Magnetocaloric effect, Entropy, Quantum phase transitions, Full diagonalization

# مقدمه

فیزیک دمای پایین را می توان شاخه ای از علم فیزیک دانست که با خواص فیزیکی ماده در یک محدوده ی دمایی خاص مرتبط است. در این محدوده ی خاص دمایی که معمولاً بسیار کم و نزدیک به دمای صفر مطلق است، رفتار سیستم تحت کنترل افت و خیزهای گرمایی و افت و خیزهای کوانتومی است. به طور کلی می توان گفت که با کاهش دما پدیده های کوانتومی در مقیاس ماکروسکوپیک مشاهده می شوند.

خواص فیزیکی و به ویژه رفتار دمای پایین مواد مغناطیسی کم-بُعد، در سال های اخیر توجه بسیاری را در زمینه فیزیک ماده چگال به خود جلب کرده است. تاریخچه مطالعه در شاخه ی مغناطیس کم بُعد<sup>۱</sup> به تقریباً ۹۰ سال پیش بر می گردد. در سال ۱۹۲۵ ارنست آیزینگ برای توجیه میکروسکوپی نظریه میدان ملکولی وایس [۱]، مدلی را ارائه کرد که اکنون نیز به نام وی شناخته می شود. او نسخه ی یک بعدی مدلش را توانست حل کند. پس از او در سال ۱۹۳۱، هنس بته<sup>۲</sup> مقاله ی معروفش، که شامل روش حدس بته<sup>۳</sup> برای پیدا کردن حالت پایه کوانتومی مُدل هایزنبرگ پاد فرومغناطیس اسپین ۱/۲ در یک بُعد است را

---

<sup>۱</sup> Low dimensional  
<sup>۲</sup> Hans Bethe  
<sup>۳</sup> Bethe ansatz

منتشر کرد [۲]. در ابتدا تمام کارهای انجام شده در دیدگاه نظری قرار داشتند. در حدود سال ۱۹۷۰ مشخص شد که مدل های یک بعدی و دو بعدی ممکن است مربوط به مواد واقعی شوند که می توانند در طبیعت یافت شوند. نکته ی جالب تر این که در دو دهه ی گذشته موادی در طبیعت با ساختاری مشاهده شده اند که نه جزء سیستم های یک بعدی محسوب می شوند و نه می توان آن ها را در گروه سیستم های دو بعدی گنجانند. این مواد موسوم به نردبان های مغناطیسی اند که از چندین زنجیره ی اسپینی جفت شده تشکیل می شوند [۳]. هر زنجیره معرف یک پای نردبان است. نردبان های مغناطیسی خواص جالبی از خود به نمایش می گذارند و تاکنون مشاهدات تجربی و بررسی های نظری نشان داده است که نردبان ها کاربرد وسیعی در بسیاری از زمینه ها از جمله ابررسانایی دمای بالا، ارتباطات و اطلاعات کوانتومی دارند [۴-۶]. از این رو مطالعه ی ابعاد مختلف این نوع سیستم های اسپینی از اهمیت خاصی برخوردار است. به ویژه نردبان های دو پا با اسپین ۱/۲ به دلیل وجود گاف در طیف برانگیختگی آن ها این اهمیت دو چندان است. بررسی خواص ترمودینامیکی در سیستم هایی که در طیف برانگیختگی آن ها گاف مشاهده می شود از جذابیت ویژه ای برخوردار است. از توابع مهم ترمودینامیکی می توان ظرفیت گرمایی را برشمرد. کمیت  $C_x$  (ظرفیت گرمایی) به صورت نسبت گرمای داده شده به سیستم بر میزان تغییر دمای سیستم، تعریف می شود. این کمیت به شرایط محیطی که تحت آن مقداری گرما به سیستم انتقال می یابد، بستگی دارد. اگر این شرایط در فشار ثابت صورت گیرد می توان  $C_p$  را اندازه گیری کرد و اگر در حجم ثابت انجام شود،  $C_v$  اندازه گیری می شود. ظرفیت گرمایی به ازای واحد جرم ماده، گرمای ویژه<sup>۴</sup> نامیده می شود.

خاصیت جالب دیگری که در همه ی مواد مغناطیسی به صورت ذاتی وجود دارد، اثر مگنتو کالریک است. اثر مگنتو کالریک یک پدیده ی مغناطیس-ترمودینامیکی است. در این پدیده، با قرار دادن یک ماده در معرض میدان مغناطیسی متغیر، یک تغییر دمایی در سیستم ایجاد می شود. این اثر نخستین بار توسط واربرگ<sup>۵</sup> در سال ۱۸۸۱ در آهن کشف شد [۷]. این اثر در همه ی مواد مغناطیسی به طور ذاتی مشاهده می شود اگرچه شدت این اثر به خواص هر ماده بستگی دارد. واربرگ مشاهده کرد که با اعمال میدان مغناطیسی به آهن و تغییر آن به صورت بی دررو، دمای آن تغییر می کند [۷]. لانژون<sup>۶</sup> در سال ۱۹۰۵ نشان

---

Specific Heat<sup>۴</sup>  
Warburg<sup>۵</sup>  
Langevin<sup>۶</sup>

داد که به طور کلی مغناطش پارامغناطیس باعث ایجاد یک تغییر دمایی معکوس می شود. ۲۰ سال طول کشید تا اولین پیشنهاد استفاده کاربردی از اثر مگنتوکالریک، توسط دبای<sup>۷</sup> (۱۹۲۶) و گیائوکه<sup>۸</sup> (۱۹۲۷) مطرح شد:

استفاده از وامغناطش بی درروی نمک های پارامغناطیس به منظور رسیدن به دمای پایین تر از هلیوم مایع (پایین ترین دمای تجربی که تا آن زمان به دست آمده بود).

این اثر پاسخ ماده مغناطیسی به تغییر میدان است که به صورت تغییر دمای نمونه ظاهر می شود. به طور کلی این اثر ناشی از جفت شدگی زیر شبکه مغناطیسی با میدان اعمالی است که باعث تغییر سهم مغناطیسی آنتروپی کل ماده می شود. برای نشان دادن دلیل افزایش اثر مگنتوکالریک، یک سیستم اسپینی پارامغناطیس یا فرو مغناطیس را در نظر می گیریم. آنتروپی چنین سیستمی را می توان به صورت جمع دو آنتروپی ناشی از نظم مغناطیسی و آنتروپی مرتبط با دما در نظر گرفت. اعمال میدان مغناطیسی، گشتاورهای مغناطیسی سیستم را که به وسیله ی افت و خیزهای گرمایی بی نظم شده اند، منظم می کند. از این رو آنتروپی مرتبط با نظم مغناطیسی (آنتروپی مغناطیسی) کاهش پیدا خواهد کرد. حال اگر میدان مغناطیسی تحت شرایط بی دررو (در حالتی که هیچ تبادل گرمایی با محیط اطراف نباشد) اعمال شود، آنتروپی مرتبط با دما بایستی به منظور ثابت نگه داشتن آنتروپی کل سیستم، افزایش پیدا کند. این فرآیند باعث گرم شدن سیستم می شود و دمای آن افزایش پیدا می کند. فرآیند معکوس یعنی کاهش میدان مغناطیسی (وامغناطش) سبب سرد شدن سیستم مورد مطالعه می شود. تغییر دمایی توصیف شده نمادی از اثر مگنتوکالریک است.

در سال های اخیر مطالعه ی اثر مگنتوکالریک به طرز چشمگیری افزایش پیدا کرده است. سهولت به دست آوردن اطلاعات در مورد حالت مغناطیسی و گذارهای فاز مغناطیسی [۸] و همچنین استفاده از مواد مغناطیسی به عنوان اجزای سازنده سرد کننده های مغناطیسی، به منظور رسیدن به دماهای خیلی پایین از مهمترین دلایل مورد توجه قرار گرفتن اثر مگنتوکالریک است. اخیراً پیش بینی شده است که اثر مگنتوکالریک بزرگی در مجاورت گذارهای میدان متناهی در پاد فرومغناطیس هایی که به صورت هندسی وامانده<sup>۹</sup> هستند، ایجاد می شود [۹، ۱۰].

---

Debye<sup>۷</sup>  
Giaouque<sup>۸</sup>

frustration<sup>۹</sup>

هدف این پایان نامه بررسی رفتار دمای پایین و همچنین مطالعه ی اثر مگنتو کالریک سیستم نردبان دو-پای اسپین ۱/۲ است. با استفاده از اطلاعات به دست آمده از دمای نزدیک به صفر می توان رفتار سیستم های مغناطیسی در دمای صفر، که در تجربه دسترسی به آن امکان پذیر نیست را پیش بینی نمود.

این پایان نامه شامل پنج فصل می باشد. در فصل اول گذارهای فاز کوانتومی را معرفی کرده و مفاهیم اساسی گذارهای فاز را بیان می کنیم. در فصل دوم به بررسی مواد مغناطیسی منظم و سیستم های اسپینی می پردازیم در این فصل سعی شده است پس از توضیح این که به چه سیستم هایی، سیستم های اسپینی اطلاق می شود به ارائه ی تعریفی از نردبان های اسپینی دو پا و بیان ویژگی های منحصر به فرد آن ها پرداخته شود. فصل سوم به توضیح مفاهیم کلی در رابطه با اثر مگنتو کالریک اختصاص دارد و با استفاده از روش های ترمودینامیکی و مکانیک آماری به محاسبه ی مقدار این کمیت می پردازیم. فصل چهارم مربوط به رفتار دمای پایین سیستم های نردبانی دو-پای اسپین ۱/۲ است. در این فصل ابتدا به معرفی توابع پاسخ ترمودینامیکی پرداخته و سپس به صورت عددی به کمک روش قطری سازی کامل به محاسبه ی این توابع می پردازیم. در انتهای این فصل به مقایسه ی نتایج به دست آمده از محاسبات عددی فوق و نتایج حاصل از مشاهده ی تجربی می پردازیم و مشاهده می کنیم که نتایج در توافق بسیار خوبی با مشاهدات تجربی هستند. سرانجام در فصل پنجم به جمع بندی مطالب و نتیجه گیری محاسبات انجام شده می پردازیم.



## فصل اول

# گذارهای فاز کوانتومی

### ۱-۱ مقدمه

گذارهای فاز<sup>۱</sup> به طور جدی از زمان پیدایش علم ترمودینامیک مورد مطالعه قرار گرفته شده اند. هر سیستم فیزیکی می تواند در فاز های مختلفی قرار داشته باشد. منظور از فاز، حالتی همگن از یک سیستم است که از قسمت های دیگر به وسیله ی مرزی کاملاً مشخص، جدا شده باشد و به لحاظ فیزیکی دارای خواص یکسانی هستند [۱۱]. گذار فاز تبدیل یک حالت (فاز) از یک سیستم فیزیکی به حالت دیگری است. در طول یک گذار فاز، خواص فیزیکی یک سیستم در اثر تغییر پارامترهای خارجی قابل کنترل در سیستم مانند دما، فشار، میدان مغناطیسی و ... تغییر می کند.

گذارهای فاز وقایع بسیار متداولی هستند که در طبیعت دیده می شوند: جوشیدن آب، ذوب شدن یخ و در موارد پیچیده تر از دست دادن خاصیت مغناطیسی آهن در دماهای بالاتر از ۷۷۰ درجه از نمونه های متداول این فرآیند در محیط پیرامون ما می باشد. اکنون سؤالی که مطرح می شود این است که چگونه سیستم از یک حالت ماکروسکوپی خاص به حالت دیگر منتقل می شود؟

---

<sup>۱</sup> Phase transitions

به عنوان مثال یخ و آب هر دو از مولکول های  $H_2O$  تشکیل شده اند. در پایین تر از دمای صفر درجه مولکول های  $H_2O$  در یک شبکه ی کریستالی منظم قرار گرفته اند و هر مولکول  $H_2O$  به ندرت از مکان شبکه ی خود منحرف می شود. در بالاتر از دمای صفر درجه ی سانتیگراد آب در حالت مایع وجود دارد که در آن همه ملکول ها با آزادی درون ظرف حرکت می کنند. چرا ملکول های  $H_2O$  در یک دمای مشخص همگی شروع به حرکت می کنند که منجر به گذار فاز از حالت یخ به آب می شود؟

به طور کلی رقابت بین انرژی (E) و آنتروپی<sup>۲</sup> (S) منجر به پدیده ی گذار فاز می گردد. طبق اصول ترمودینامیک، سیستم های در حال تعادل گرمایی تمایل به کمینه کردن انرژی آزاد خود دارند.

$$F = E - TS \quad (1.1)$$

در آب انرژی درونی توسط بر هم کنش های بین مولکول های آب تعیین می شود. هنگامی که در دمای صفر درجه ملکول ها در حالت کریستالی (فاز یخ) قرار بگیرند، انرژی آزاد کمینه می شود، زیرا آنتروپی که درجه بی نظمی یک فاز را تعیین می کند متناسب با لگاریتم تعداد حالت های میکروسکوپی قابل دسترس مولکول ها است. در دماهای پایین سهم جمله ی دوم در رابطه ی (۱.۱) کم شده و جمله ی انرژی درونی مهم می شود. بنابراین کم شدن انرژی بر افزایش آنتروپی غلبه کرده و در نتیجه فاز یخ که کمینه انرژی درونی را داراست، حاصل می شود. در حالیکه در دماهای بالا سهم آنتروپی در انرژی آزاد اهمیت پیدا می کند و با قرار گرفتن مولکول های آب در فاز مایع، انرژی آزاد سیستم کمینه می گردد.

به طور کلی هنگامی که با تغییر پارامتر کنترل، سیستم از یک فاز به فاز دیگر می رود لازم است که توابع پاسخ سیستم که مشتق های مرتبه دوم انرژی آزادند، دچار تغییرات ویژه ای گردند. گذار فاز زمانی روی می دهد که یک تکینگی در انرژی آزاد سیستم یا یکی از مشتق های آن وجود داشته باشد.

## ۱-۲ مفاهیم اساسی گذارهای فاز

به طور معمول گذارهای فاز به دو دسته ی گذارهای فاز مرتبه ی اول و گذارهای فاز مرتبه ی دوم تقسیم می شوند [۱۱،۱۲].

گذارهای فاز مرتبه ی اول شامل یک گرمای نهان هستند [۱۳]. یک سیستم در طی چنین گذارهایی یک مقدار ثابت (معمولاً بزرگ) انرژی را جذب یا آزاد می کند. در طی این فرآیند دمای سیستم با افزایش گرما ثابت باقی می ماند. در این نوع از گذار فاز، دو فاز در نقطه ی گذار هم زیستی دارند، مثل آب و یخ در دمای  $C^{\circ}$  یا بخار و آب در دمای  $C^{\circ} 100$ . چنین گذارهایی با یک تغییر ناپیوسته ی حالت (مشتقات اول ناپیوسته در تابع گیبس<sup>۳</sup>) همراهند [۱۲].

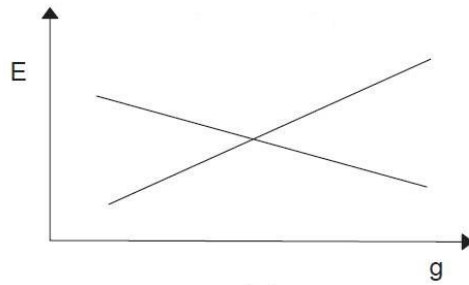
دومین دسته از گذار فازها، گذارهای فاز پیوسته یا مرتبه ی دوم نامیه می شوند [۱۱]. این گذارها با تغییر پیوسته ی تابع حالت (ناپیوستگی در مشتق دوم و بالاتر تابع گیبس) همراهند. در این دسته از گذار فازها هیچ گرمای نهانی وجود ندارد و دو فاز در نقطه ی گذار هم زیستی ندارند. یک مثال مهم، گذار فاز فرومغناطیسی آهن در دمای  $C^{\circ} 770$  است. نقطه ی گذار در گذارهای فاز پیوسته نقطه ی بحرانی نامیده می شود. معمولاً گذارهای فاز پیوسته با یک متغیر جدیدی مشخص می شوند که پارامتر نظم<sup>۴</sup> نامیده می شود. پارامتر نظم تابعی ترمودینامیکی است که در یک فاز مقدار صفر و در فاز بعدی مقداری غیر صفر دارد. مثلاً در مورد گذار آهن از حالت فرومغناطیسی به پارامغناطیسی، مغناطش کل به عنوان پارامتر نظم تعریف می شود که پایین دمای بحرانی، مغناطش مقداری غیر صفر داشته و در دماهای بالا تر، مغناطش صفر می شود. لازم به ذکر است که هر چند در خیلی از مواقع تشخیص پارامتر نظم در یک گذار فاز بسیار ساده است اما مواردی پیش می آید که انتخاب پارامتر نظم مناسب، بسیار پیچیده می شود.

### ۱-۳ گذارهای فاز کوانتومی

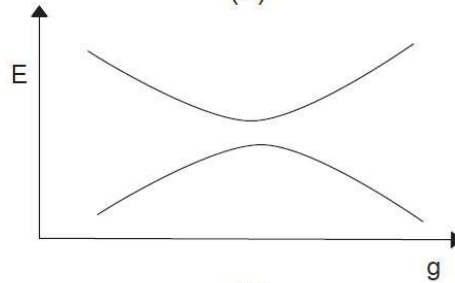
گذار فاز کوانتومی همانند گذار فاز کلاسیکی است با این تفاوت که در دمای صفر مطلق اتفاق می افتد. این بدان معناست که افت و خیزهای گرمایی در این نوع از گذارهای فاز نقشی ندارد. در بسیاری از سیستم های کوانتومی این نوع از گذار فاز دیده می شود. در واقع در چنین سیستم هایی به علت از بین رفتن نظم موجود در سیستم توسط افت و خیزهای کوانتومی، که ریشه در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ [۱۴] دارند، گذار فاز روی می دهد.

---

<sup>۳</sup> Gibbs  
<sup>۴</sup> Order parameter



(a)



(b)

شکل ۱-۱: ترازهای انرژی بر حسب پارامتر  $g$ . شکل (a) یک تلاقی واقعی تراز و شکل (b) یک تلاقی اجتناب شده را نشان می دهد [۶].

فرض کنید  $H(g)$  هامیلتونی یک شبکه با اندازه ماکروسکوپی باشد که در آن  $g$  یک پارامتر بدون بُعد است. تمام مشاهده پذیرهای مربوط به حالت پایه سیستم، دارای تغییرات آرامی با  $g$  هستند. از طرفی امکان وجود نقاطی مانند  $g = g_c$  است، که در آن در بعضی از خواص حالت پایه، رفتار غیر تحلیلی مشاهده شود [۱۵]. در این حالت نقطه  $g_c$  را نقطه ی گذار فاز کوانتومی می نامند. بنابراین گذار فاز کوانتومی در جایی اتفاق می افتد که خواص حالت پایه سیستم به صورت تابعی از پارامتر کنترلی  $g$ ، غیر تحلیلی شود. هنگامی که یک تراز برانگیخته در نقطه  $g = g_c$  به حالت پایه برسد و آن را قطع کند، یک نقطه ی غیر تحلیلی در انرژی حالت پایه ایجاد می شود. امکان وقوع این اتفاق برای شبکه های نامتناهی بیشتر است. در یک شبکه ی متناهی امکان اینکه یک تراز برانگیخته به تراز حالت پایه نزدیک شود با افزایش اندازه ی شبکه بیشتر می شود. به طوریکه در حد نامتناهی و در حد ترمودینامیکی منجر به تلاقی ترازها و ایجاد نقطه ی غیر تحلیلی در انرژی حالت پایه می شود. بنابراین غیر تحلیلی بودن ناشی از دو عامل است. یکی اینکه به عنوان نتیجه ی یک تلاقی واقعی ترازها باشد (شکل (a) ۱-۱)، که در این صورت یک گذار فاز مرتبه اول کوانتومی داریم و دیگری به صورت حالت حدی اجتناب از تلاقی

ترازها باشد (شکل (b) ۱-۱)، که گذار پیوسته نامیده می شود [۱۶].